下载APP

26 | 模型训练（上）：决策树系列算法详解

2021-11-10 吴磊

《零基础入门Spark》 课程介绍 >

讲述：吴磊
时长 16:14 大小 14.88M

你好，我是吴磊。

在上一讲，我们重点介绍了机器学习中的特征工程，以及 Spark MLlib 框架支持的特征处理函数。基于线性回归模型，我们对比了不同特征处理方法下的模型效果。一般来说，线性模型的模型容量比较有限，它仅适合拟合特征向量与预测标的之间存在线性关系的场景。

领资料

但在实际应用中，线性关系少之又少，就拿“房价预测”的项目来说，不同的房屋属性与房价之间，显然不是单纯的线性关系。这也是为什么在房价预测的任务上，线性回归模型的预测误差一直高居不下。因此，为了提升房价预测的准确度，我们有必要从模型选型的角度，着手去考虑采用其他类型的模型算法，尤其是非线性模型。

Spark MLlib 框架支持种类丰富的模型算法，为了在减轻你学习负担的同时，尽量全面地覆盖其中的内容，我把模型训练分为了上、中、下三讲。今天这一讲，我们专注在决策树系列算法的讲解。

后面两讲我再结合房屋预测和电影推荐场景，带你在实践中掌握 Spark MLlib 模型算法，从而让你在不同的场景下得心应手地开展模型选型与模型调优。

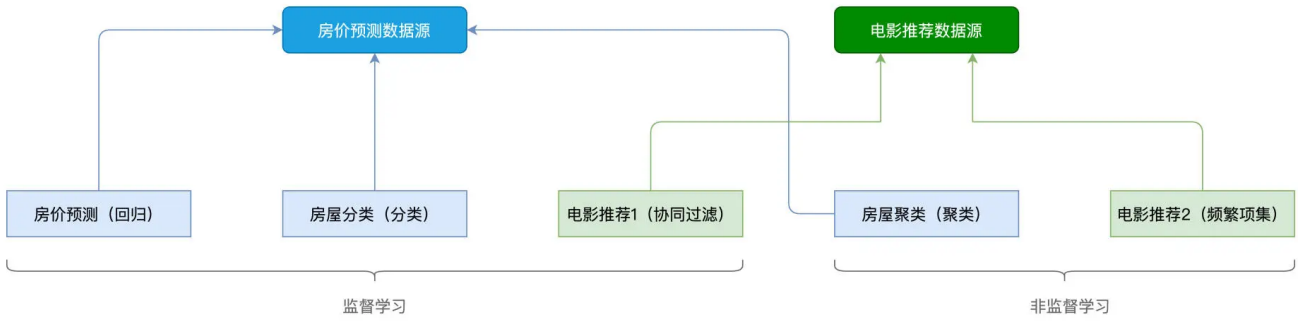
课程安排

因为模型训练的部分内容比较丰富，为了让你有一个清晰的学习计划，咱们还是先来交代一下课程安排。在机器学习领域，如果按照“样本是否存在预测标的（Label）”为标准，机器学习问题可以分为监督学习（Supervised Learning）与非监督学习（Unsupervised Learning）。Spark MLlib 同时支持这两大类机器学习算法，如下图所示。

Spark MLlib支持的模型算法

可以看到，在 Spark MLlib 开发框架下，按照使用场景不同，监督学习又被细分为回归（Regression）、分类（Classification）和协同过滤（Collaborative Filtering）；而非监督学习被细分为聚类（Clustering）与频繁项集（Frequency Patterns）。

不同的分类下，Spark MLlib 支持的模型算法多样而又庞杂。如果逐一讲解每种算法的原理和用法，不但枯燥乏味，而且容易遗忘。所以，对于每个分类，我都会精选一个最具代表性的算法，再结合实例进行讲解，这样你学完之后印象会更加深刻。



实例分类

与 5 个子分类相对应，模型训练课程的实例也有 5 个，分别是房价预测、房屋分类、电影推荐 1、房屋聚类、电影推荐 2。根据数据来源的不同，这 5 个实例又可以分为两类，如下图所示。

为了照顾基础薄弱的同学，我们需要先搞清楚决策树、GBDT（Gradient-boosted Decision Trees）和 RF（Random Forest）这些前置知识。学完这节课之后，你会发现一个很有趣的现象，这些知识点背后的原理跟人类的决策过程惊人的相似，但相比人类经验，机器又能青出于蓝。

好啦，让我们正式开始今天的学习。

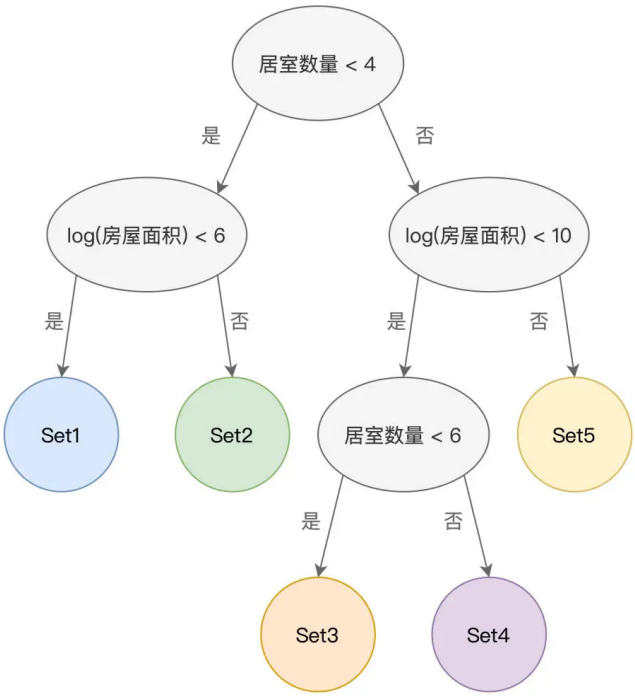
决策树系列算法

马上就是“双十一”了，你可能很想血拼一把，但一摸自己的钱包，理智又占领了高地。试想一下，预算有限的情况下，你会如何挑选一款手机呢？我们往往会结合价位、品牌、评价等一系列因素考量，最后做出决策。

其实这个依据不同决定性因素来构建决策路径的过程，放在机器学习里，就是决策树。接下来，我们用严谨一点的术语再描述一下什么是决策树。

决策树（Decision Trees）是一种根据样本特征向量而构建的树形结构。决策树由节点（Nodes）与有向边（Vertexes）组成，其中节点又分为两类，一类是内部节点，一类是叶子节点。内部节点表示的是样本特征，而叶子节点代表分类。

举例来说，假设我们想根据“居室数量”和“房屋面积”这两个特征，把房屋分为 5 类。那么，我们就可以构建一个决策树，来做到这一点，如下图所示。



极客时间

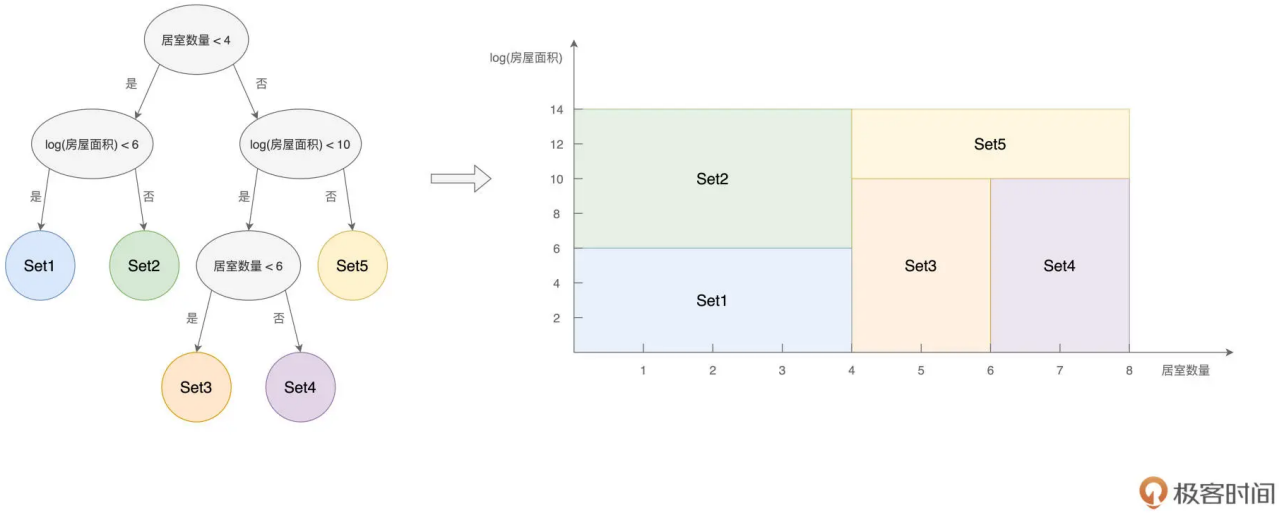
决策树示意图

其中，椭圆形代表的是内部节点，每个内部节点都包含一个特征，并同时拥有两条有向边。每条有向边，都表示一组特征取值。比方说，图中决策树的根节点（顶端的内部节点）包含的特征是“居室数量”，左边的有向边，表示的是居室数量小于 4 的数据样本；而右边的有向边，代表的是居室数量大于等于 4 的数据样本。

就这样，原始的房屋样本被一分为二，按照居室数量被“劈”成了两份。“劈”到左侧的样本，继续按照“房屋面积”是否小于 6 作区分；而“劈”到右侧的样本，则按照“房屋面积”是否小于 10 来做进一步的区分。就这样，根据不同特征的不同取值范围，数据样本一层一层地被加以区分，直到圆形节点，也即叶子节点为止。

叶子节点表示数据样本的分类，图中的 5 个圆形即代表 5 个叶子节点。每个叶子节点中，都包含若干的数据样本，显然，掉落到同一个叶子节点的样本，同属于一个分类。

不难发现，在上面的决策树中，结合“居室数量”和“房屋面积”这两个特征的不同取值，原始的数据样本被划分成了“不重不漏”的 5 份子集，如下图所示。



决策树算法示意图

基于这 5 份样本子集，我们就有能力去解决分类或是回归问题。假设数据样本中的标签列（Label）是“房屋质量”，数据样本，按照房屋质量的取值，被分为差、一般、好、很好和极好。

决策树中的 5 个叶子节点，对应的就是 Label 的 5 个不同取值。因此，凡是掉落在蓝色圆形节点的样本，它的房屋质量都是“差”，同理，凡是掉落在黄色圆形节点的样本，对应的房屋质量都是“极好”。如此一来，我们便按照“房屋质量”完成了对原始样本的分类过程。

实际上，回归过程也是类似的。如果数据样本中的标签不再是离散的“房屋质量”，而是连续的“房屋价格”，那么我们同样可以利用决策树来完成回归预测。假设我们用 100 条数据样本，来构建上面的决策树，并假设每个叶子节点都包含 20 条数据样本。

那么，当有一条新的数据样本需要预测房价的时候，我们只需要让它遍历决策树，然后看看它掉落到哪一个叶子节点中去。假设它掉落到了 Set3 这个节点，那么要预测这条样本的房价，我们就取 Set3 中那 20 条样本的房价均值。

好啦，到此为止，我们介绍了什么是决策树，怎么用决策树来预测新的数据样本。不难发现，**决策树的推理过程，与人类的决策过程非常相似。**

人类也常常“货比三家”，结合生活经验，根据一些关键因素做出决策。说到这里，你可能会好奇：“我做决定的时候，往往是结合生活经验，那么模型算法是依据什么，来构建

决策树的呢？它怎么知道，哪些特征是决定性因素，而哪些特征又没什么用呢？”

用一句话来概括，数据样本的纯度，决定了模型算法选择哪些特征作为内部节点，同时也决定着决策树何时收敛。所谓样本纯度，简单地说，就是标签的多样性（Cardinality）。对于一个集合中的样本，如果样本的标签都一样，也即标签的多样性为 1，那么我们就说这个集合的样本纯度很高。

相反，如果这个集合中的样本标签取值非常多，多样性非常高，那么我们就说这个集合的样本纯度很低。在数学上，我们可以用信息熵来量化样本的纯度（或者说标签多样性），不过作为入门课，咱们暂时不必深究，只要从概念上理解样本的纯度就好。

模型算法在构建决策树的时候，会去遍历每一个特征，并考察每个特征的“提纯”能力。所谓“提纯”，就是把原始样本结合特征进行区分之后，两个样本子集在纯度上有所提升。换句话说，经过候选特征分割后的样本子集，其纯度越高，就代表候选特征的“提纯”能力越高。

正是基于这样的逻辑，模型算法依次筛选“提纯”能力最高、次高、第三高的特征，逐级地去构建决策树，直到收敛为止。对于收敛条件，**一方面我们可以人为地设置纯度阈值，另一方面，我们也可以通过设定树的深度（Depth、Levels）来进行限制**。

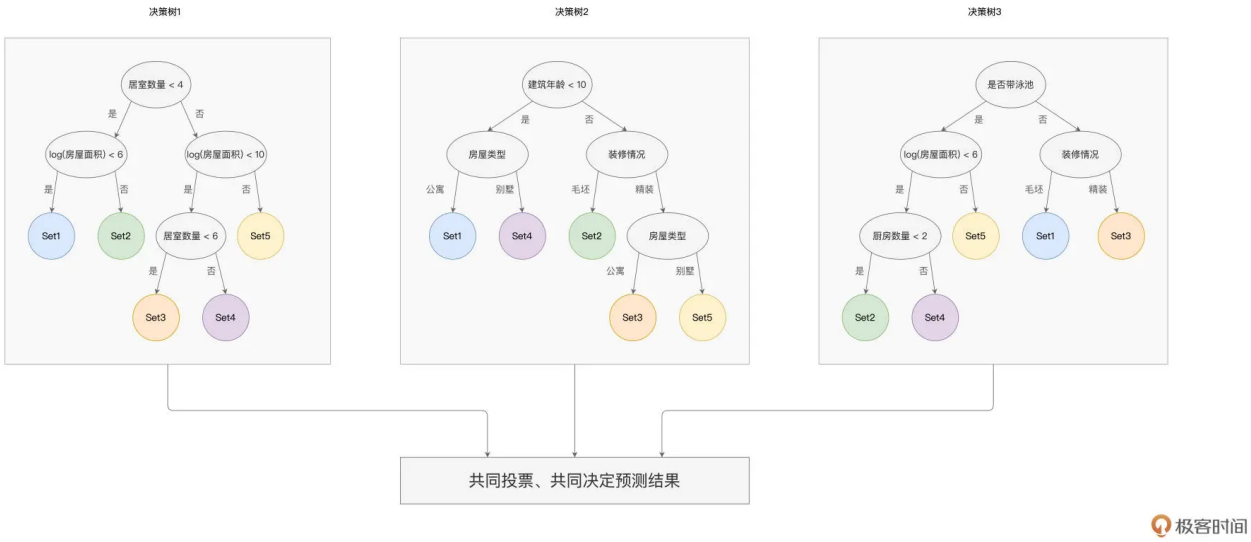
在理想情况下，我们期望决策树每个叶子节点的纯度，尽可能地接近于 0（用信息熵来量化），也即每个节点的标签都是一样的。但在实际工作中，我们很难做到这一点。不仅如此，一般来说，一棵决策树的拟合能力是相当有限的，它很难把样本的纯度提升得足够高。

这时就要说到 GBDT（Gradient-boosted Decision Trees）和 RF（Random Forest）这两种算法了，尽管它们的设计思想各不相同，但本质上都是为了进一步提升数据样本的纯度。

Random Forest

Random Forest，又叫“随机森林”，它的设计思想是“三个臭皮匠、赛过诸葛亮”。既然一棵树的拟合能力有限，那么就用多棵树来“凑数儿”，毕竟，老话说得好：人多出韩信。

举例来说，我们想结合多个特征，来对房屋质量进行分类。对于给定的数据样本，随机森林算法会训练多棵决策树，树与树之间是相互独立的，彼此之间不存在任何依赖关系。对于每一棵树，算法会随机选择部分样本与部分特征，来进行决策树的构建，这也是随机森林命名中“随机”一词的由来。



随机森林示意图

以上图为例，随机森林算法构建了 3 棵决策树，第一棵用到了“居室数量”和“房屋面积”这两个特征，而第二棵选择了“建筑年龄”、“装修情况”和“房屋类型”三个特征，最后一棵树选择的是“是否带泳池”、“房屋面积”、“装修情况”和“厨房数量”四个特征。

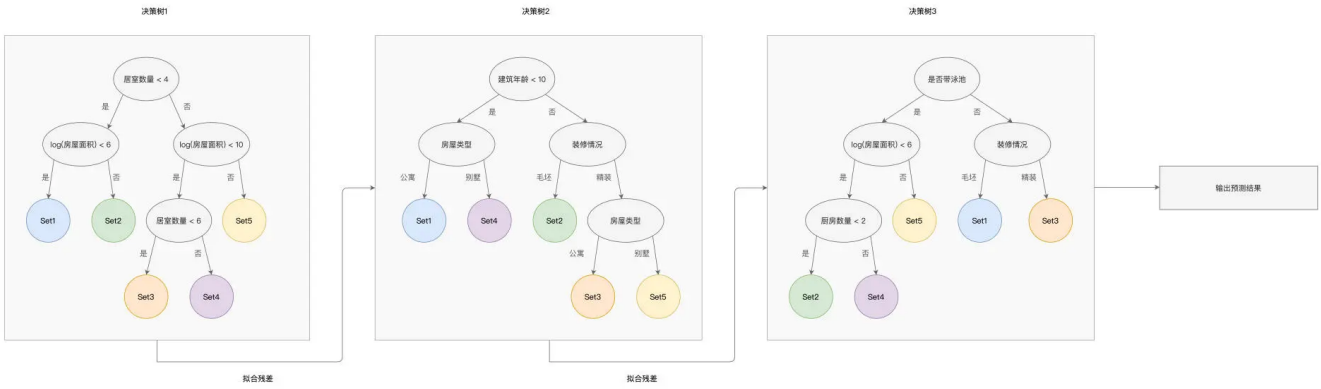
每棵树都把遍历的样本分为 5 个类别，每个类别都包含部分样本。当有新的数据样本需要预测房屋质量时，我们把数据样本同时“喂给”随机森林的 3 棵树，预测结果取决于 3 棵树各自的输出结果。

假设样本经过第一棵树的判别之后，掉落在了 Set3；经过第二棵树的“决策”之后，掉落在了 Set2；而经过第三棵树的判定之后，归类到了 Set3，那么样本最终的预测结果就是 Set3。也即按照“少数服从多数”的原则，随机森林最终的预测结果，会取所有决策树结果中的大多数。回归问题也是类似，最简单的办法，就是取所有决策树判定结果的均值。

GBDT

接下来，我们再说说 GBDT（Gradient-boosted Decision Trees）。与随机森林类似，GBDT 也是用多棵决策树来拟合数据样本，但是，树与树之间是有依赖关系的，每一棵树

的构建，都是基于前一棵树的训练结果。因此，与随机森林不同，GBDT 的设计思想是“站在前人的肩膀上看得更远”，如下图所示。



极客时间

GBDT示意图

具体来说，在 GBDT 的训练过程中，每一棵树的构建，都是基于上一棵树输出的“样本残差”。如下图所示，预测值与真实值（Ground Truth）之间的差值，即是样本残差。后面决策树的拟合目标，不再是原始的房屋价格，而是这个样本残差。

极客时间

拟合残差

以此类推，后续的决策树，都会基于上一棵树的残差去做拟合，从而使得预测值与真实值之间的误差越来越小，并最终趋近于 0。不难发现，只要 GBDT 训练的决策树足够多，预测误差就可以足够小，因此，GBDT 的拟合能力是非常强的。

不过，与此同时，我们要提防 GBDT 的过拟合问题，在训练集上过分拟合，往往会导致模型在测试集上的表现不尽如人意。解决过拟合的思路，就是让模型由复杂变得简单，要做到这一点，我们可以通过限制决策树的数量与深度，来降低 GBDT 模型的复杂度。

好啦，到此为止，我们学习了决策树，以及由决策树衍生的随机森林与 GBDT 算法。光说不练假把式，在下一讲，我们就以房价预测和房屋分类为例，体会一下在 Spark MLlib 的框架下，具体要如何应用这些算法解决实际问题。

重点回顾

好啦，到此为止，我们今天的内容就全部讲完啦。让我们一起来做个总结。

首先，你需要知道，Spark MLlib 开发框架都支持哪些模型算法，我把这些模型算法、以及算法的分类整理到了下面的脑图中，供你随时参考。

Spark MLlib支持的模型算法

你需要掌握决策树系列算法的特点与基本原理。其中，决策树系列算法，既可以用于解决分类问题，也可以解决回归问题。相比线性模型，树模型拥有更强的非线性拟合能力，而且树模型具备良好的可解释性，它的工作原理非常符合人类的思考方式。随机森林与GBDT，是衍生自决策树的两类集成类算法。

随机森林的设计思想是“三个臭皮匠、赛过诸葛亮”，通过在多棵树上随机选取训练样本与特征，随机森林将多个简单模型集成在一起，用投票的方式共同来决定最终的预测结果。

而 GBDT 的思想是“站在前人的肩膀上看得更远”，它也是基于多棵树的集成模型。与随机森林不同，在 GBDT 中，树与树之间是存在依赖关系的。每一棵树的训练，都是基于前一棵树拟合的样本残差，从而使得预测值不断地逼近真实值。**GBDT 的特点是拟合能力超强，但同时要注意决策树过深、过多而带来的过拟合隐患。**

每课一练

结合今天的课程内容，你能说说 GBDT 与 Random Forest 模型算法各自的优缺点吗？

欢迎你在留言区跟我交流互动，也推荐你把这一讲的内容分享给更多的同事、朋友。

分享给需要的人，Ta订阅后你可得 20 元现金奖励

生成海报并分享

赞 2 提建议

© 版权归极客邦科技所有，未经许可不得传播售卖。 页面已增加防盗追踪，如有侵权极客邦将依法追究其法律责任。

上一篇 25 | 特征工程（下）：有哪些常用的特征处理函数？

下一篇 27 | 模型训练（中）：回归、分类和聚类算法详解

更多学习推荐

2021 最新大厂
Go 工程师面试真题

大厂面试真题 + 金九银十全新整理 + 核心知识全覆盖

免费领取

精选留言 (2)

写留言

Geek_d4ccac
2021-11-10

RF和GBDT都是Ensemble 相比单个Decision Tree更稳定/Robust，模型表现更优。RF并没有在降低残差上做过多的努力但因为每个树都是独立的应该可以更好的并行运算。GBDT的拟合过程在不断的降低残差但会存在过拟合泛化效果差的问题，且因为树与树之间有前后关系可能只能在单个树上并行运算而不能像RF一样同时算森林里的所有树。不知道理解的对不对，请老师指点！

展开

作者回复: 完美，满分💯答案~

1

崔小豪
2021-11-14

机器学习理论中的集成学习 Ensemble Learning 最主要的学习策略为 Bagging 和 Boosting，都是从一个较弱的Learner 模型出发（例如DecisionTree)逐渐增加 Learner 的数量来的提高整个模型集群的Performance。
随机森林RF = Bagging(DT), 每棵树可以从数据或特征的一个子集上建模，来增加各个树之间的差异度，减少冗余，建模过程可以并行计算。...

展开

作者回复: 总结的很到位~ 赞👍~

尤其是项目实施原则：Simplicity，Robustness，Fault Tolerance 和 Predictable Timing；
和老弟说的精度，速度，计算资源一般只能三选二。

能看得出来，实战经验丰富，实践出发、结果导向~